



TITLE:

# 有機デバイスの基礎科学と高機能化

AUTHOR(S):

梶, 弘典

---

CITATION:

梶, 弘典. 有機デバイスの基礎科学と高機能化. 京都大学化学研究所スーパーコンピュータシステム研究成果報告書 2016, 2015: 24-24

ISSUE DATE:

2016-03

URL:

<http://hdl.handle.net/2433/214392>

RIGHT:

有機デバイスの基礎科学と高機能化  
Basic Science and Functionalization of Organic Devices

京都大学 化学研究所 分子材料化学研究領域

梶 弘典

研究成果概要

有機 EL 素子の大面積化と低コスト化の観点から、塗布型有機 EL が注目を集めている。本研究では、京都大学化学研究所スーパーコンピュータシステムを利用し、塗布型有機 EL 素子の発光材料として有用な熱活性型遅延蛍光 (Thermally Activated Delayed Fluorescence, TADF) 材料、3ACR-TRZ の開発に成功した[1]。

TADF 材料は、有機 EL 素子中で生じる一重項および三重項励起状態を 100% の効率で光に変換できる発光材料として、近年、注目を集めている。TADF を発現させるためには、発光に関与する一重項および三重項励起状態のエネルギー差 ( $\Delta E_{ST}$ ) を小さくする必要があり、そのためには発光材料の HOMO と LUMO を空間的に分離させればよいことが知られている。本研究では、量子化学計算ソフト Gaussian 09 とその結果解析ソフト GaussView を用いて、 $\Delta E_{ST}$  の相対比較ならびに HOMO、LUMO の可視化に基づく材料探索を実施した。その結果、電子ドナーである 9,9-dimethylacridane (ACR) と電子アクセプターである triphenyl-1,3,5-triazine (TRZ) を組み合わせることで、小さな  $\Delta E_{ST}$  を実現できることを見出した。ドナーとアクセプターの結合部位近くにある水素原子間の立体障害により、ドナー-アクセプター間のねじれ角はほぼ直交している。このことが、3ACR-TRZ における効果的な HOMO-LUMO 分離につながったと考えられる (Figure 1)。

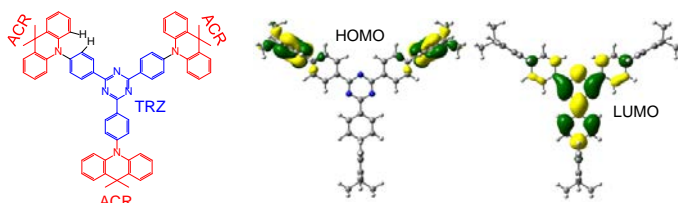


Figure 1. 3ACR-TRZ の分子構造ならびに HOMO、LUMO の分布。

3ACR-TRZ を発光材料として、塗布型有機 EL 素子 (素子構造 ITO (50 nm)/PEDOT:PSS (35 nm)/16 wt% 3ACR-TRZ:CBP (45 nm)/BmPyPhB (30 nm)/Liq (1 nm)/Al (80 nm)) を作製した。透明電極 (ITO) 付のガラス基板上に、ホール輸送層 (PEDOT:PSS) および発光層 (16 wt% 3ACR-TRZ:CBP) を塗布プロセスにより成膜した。電子輸送層 (BmPyPhB)、電子注入層 (Liq) および陰極 (Al) は真空蒸着により成膜した。上記の方法で作製した塗布型 EL 素子は最大で 18.6% の高い外部量子効率を示した。

発表論文 (謝辞あり)

[1] Wada, Y., Shizu, K., Kubo, S., Suzuki, K., Tanaka, H., Adachi, C. & Kaji, H. Highly efficient electroluminescence from a solution-processable thermally activated delayed fluorescence emitter. *Appl. Phys. Lett.* **107**, 183303 (2015)